

диффузии ДОФ из ПВХ композиций в воздушную среду и оценено влияние содержания наполнителя на их величину. По данным дериватографии проанализированы процессы, происходящие в ПВХ композициях в диапазоне температур от 25 до 450<sup>0</sup>С, и определена термостабильность ПК. Изучено поведение ПВХ композиций в водной среде. Установлено, что изменение массы образцов связано как с процессом набухания ПК, так и одновременным вымыванием из них низкомолекулярных ингредиентов. Проведен анализ жидкой фазы, находящейся в контакте с ПВХ композициями, оценено количество экстрагированного в воду пластификатора. На основании полученных результатов оптимизирован состав ПВХ пленочных композиций, обеспечивающий стабильные эксплуатационные свойства и экологическую безопасность полимерного материала.

## О РЕШЕНИИ ПРЯМОЙ КИНЕТИЧЕСКОЙ ЗАДАЧИ ПОЛИМЕРИЗАЦИИ ИЗОПРЕНА ДЛЯ ПОЛИЦЕНТРОВОЙ КАТАЛИТИЧЕСКОЙ СИСТЕМЫ $\text{VOCl}_3$ -ТИБА

*Абдулова Э.Н., Максютова Э.Р.*

Башкирский государственный университет, Уфа

Рассматривается “безобрывная” полимеризация изопрена на каталитической системе  $\text{VOCl}_3$ -триизобутилалюминий с учетом кинетической неоднородности катализатора.

Кинетическая схема процесса будет включать три стадии: рост цепи, передачу цепи на мономер, передачу цепи на алюминийорганическое соединение.

Математическое описание процесса заключается в составлении системы дифференциальных уравнений, каждое из которых характеризует скорость изменения концентрации реакционного компонента во времени.

Согласно полученной модели ставится прямая кинетическая задача – рассчитать концентрации участвующих в процессе реагентов и построить молекулярно–массовое распределение. При решении используется метод распараллеливания одной задачи на несколько подзадач, каждая из которых решается независимо от других. Полученная система дифференциальных уравнений делится на четыре подсистемы по каждому типу активных центров. Преобразованные методом моментов [1] системы решаются численным методом Рунге–Кутты IV порядка [2,3]. Рассчитанные значения моментов подставляются в формулы для расчета молекулярно–массовых характеристик полимера [3].

Таким образом, полученная математическая модель с учетом протекания процесса на четырех типах активных центров позволяет рассчитать средние молекулярные массы полимера и построить молекулярно-массовое распределение.

1. Подвальный С.Л. Моделирование промышленных процессов полимеризации. М.: Химия, 1979. – 350с.
2. Самарский А.А. Введение в численные методы: учебное пособие для вузов. М.: Наука, 1987. – 288с.
3. Френкель С.Я. Введение в статистическую теорию полимеризации. М.: Наука, 1965. – 286с.

## КВАНТОВО-ХИМИЧЕСКОЕ ИССЛЕДОВАНИЕ ВЛИЯНИЯ ХЛОРИСТОГО ВОДОРОДА НА ПРОЦЕСС ДЕСТРУКЦИИ ПОЛИВИНИЛХЛОРИДА

*Борисевич С.С., Янборисов В.М.*

Уфимская государственная академия экономики и сервиса

При термической деструкции ПВХ наблюдается автокаталитическое ускорение реакции дегидрохлорирования в присутствии хлористого водорода в замкнутом объеме [1, 2]. Однако до сих пор не ясно, как молекула HCl влияет на скорость стадий дегидрохлорирования макромолекул: реакции отщепления HCl из нормальных ВХ звеньев; дегидрохлорирования  $\beta$ -хлораллильных и полиенилхлоридных группировок.



Рис. 1. Переходные состояния реакции дегидрохлорирования

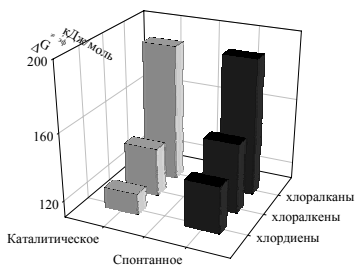


Рис.2. Эффективная свободная энергия активации реакции дегидрохлорирования хлоралканов, хлоралкенов и хлордиенов.

С помощью метода B3LYP с базисными набором 6-31G(d) в рамках четырехцентрового мономолекулярного механизма исследованы реакции спонтанного и каталитического дегидрохлорирования низкомолекулярных соединений, имитирующих нормальные винилхлоридные звенья,  $\beta$ -хлораллильные и полиенилхлоридные группировки. Найденны активированные комплексы данных реакций (рис. 1). Результаты расчетов показали, что хлористый водород в рамках исследуемого механизма не